

## APLICAÇÃO DO MÉTODO DA MÉDIA NO VOLUME NA MODELAGEM MATEMÁTICA NA MICROESCALA DE ADSORVENTES UTILIZANDO ISOTERMA LINEAR E CÁLCULO DO TENSOR DE DIFUSIVIDADE EFETIVA

CLEUZIR DA LUZ<sup>1</sup>, ANA MARIA TISCHER<sup>2</sup> e JULIA VILLAIN MARTINHAGO<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Orientador, Departamento de Engenharia de Alimentos e Engenharia Química, UDESC Oeste – cleuzir@udesc.br

<sup>2</sup> Acadêmica do Curso de Engenharia Química – Bolsista PIVIC/ UDESC Oeste

<sup>3</sup> Acadêmica do Curso de Engenharia de Alimentos – UDESC Oeste

Palavras-chave: Adsorção; Isoterma Competitiva; Modelagem Matemática; Método da Média no Volume.

Adsorção é um fenômeno de superfície no qual um soluto é removido de uma fase fluida e acumulado na superfície de uma fase sólida. Geralmente as misturas submetidas ao processo de separação por adsorção usam adsorventes caracterizados por meios porosos com diferentes escalas de comprimento. Quando existe uma disparidade entre estas escalas, o Método da Média no Volume pode ser usado na modelagem matemática carregando, hierarquicamente, as informações físicas entre as escalas. Neste trabalho é usada a isoterma linear  $C_{Si} = K_i C_{i\gamma}$ , em que  $K_i$  é o coeficiente de equilíbrio de adsorção e  $C_{i\gamma}$  é a concentração pontual da espécie química  $i$  na fase  $\gamma$  do volume de controle  $V_\omega = V_\gamma + V_\kappa$ , e é aplicado o Método da Média no Volume para obter um modelo matemático em concentrações médias volumétricas para fases sólida ( $\kappa$ ) e líquida ( $\gamma$ ). O modelo matemático obtido possui informações físicas da microescala do adsorvente e uma expressão teórica para o tensor de difusividade efetiva, no qual neste trabalho foi obtido mediante a resolução numérica e analítica do chamado problema de fechamento, evitando assim a necessidade de utilização de parâmetros ajustáveis no processo. O modelo matemático na forma fechada da equação para microescala é dado por:

$$\varepsilon_\gamma \left( 1 + \frac{a_v |_{\gamma\kappa} K_i}{\varepsilon_\gamma} \right) \frac{\partial \langle C_{i\gamma} \rangle^\gamma}{\partial t} = \nabla \cdot \left( \varepsilon_\gamma \mathbf{D}_{eff\ i} |_{\gamma\kappa} \cdot \nabla \langle C_{i\gamma} \rangle^\gamma \right), \text{ em que } \langle C_{i\gamma} \rangle^\gamma = \frac{1}{V_\gamma} \int_{V_\gamma} C_{i\gamma} dV, \quad 01$$

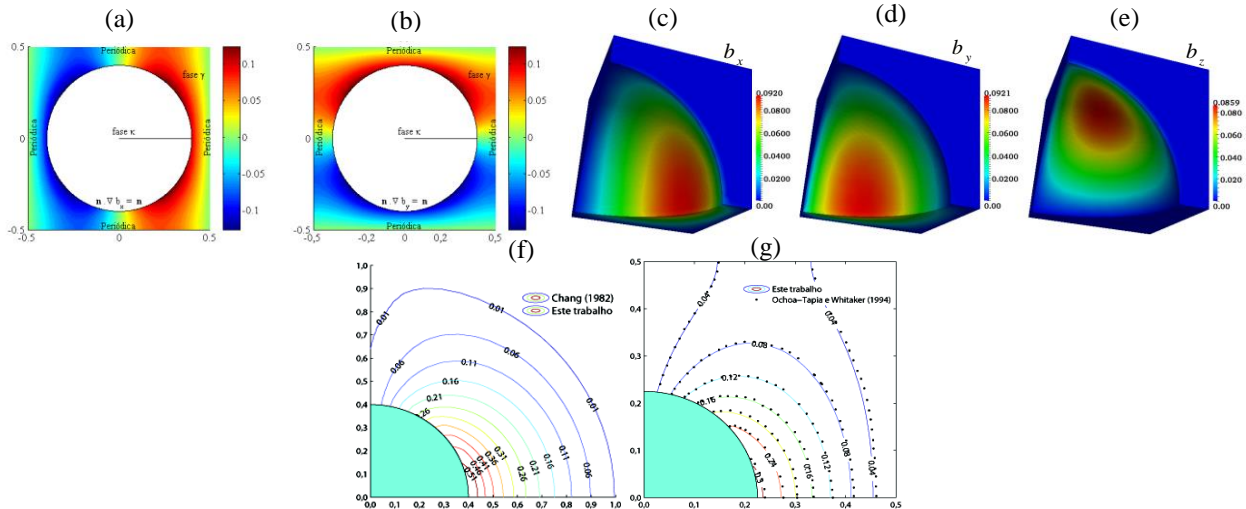
$$\mathbf{D}_{eff\ i} |_{\gamma\kappa} = \mathcal{D}_{i\gamma} \left( \mathbf{I} + \frac{1}{V_\gamma} \int_{A_{\gamma\kappa}} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \mathbf{b}_{i\gamma} dA \right) \text{ é o tensor difusividade efetiva da espécie } i \text{ e o} \quad 02$$

problema de fechamento para variável de fechamento  $\mathbf{b}_{i\gamma}$  é dado por:

**Problema I** :  $\nabla^2 \mathbf{b}_{i\gamma} = 0$  03

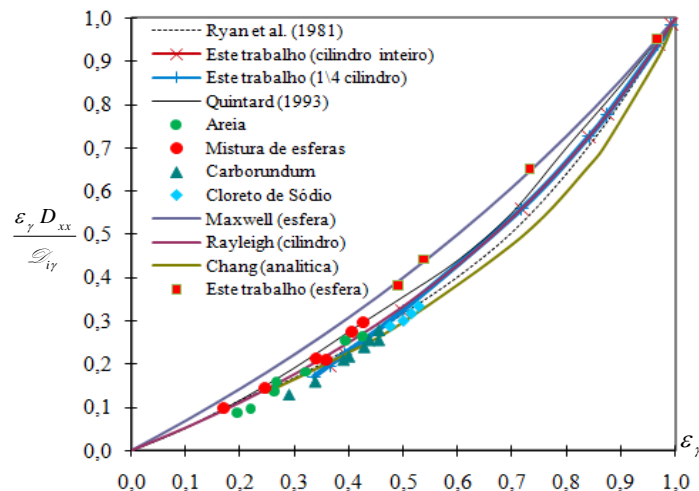
C.C.1 -  $\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \nabla \mathbf{b}_{i\gamma} = \mathbf{n}_{\gamma\kappa}$  em  $\mathcal{A}_{\gamma\kappa}$  e Periodicidade:  $\mathbf{b}_{i\gamma}(\mathbf{r} + \ell_j) = \mathbf{b}_{i\gamma}(\mathbf{r})$ ,  $j=1, 2, 3$  04

Em que  $\mathcal{D}_{iy}$  é a difusividade molecular da espécie  $i$ ,  $n_{\gamma\kappa}$  é o vetor unitário normal à área  $\mathcal{A}_{\gamma\kappa}$ ,  $\varepsilon_\gamma$  é a porosidade e  $a_v|_{\gamma\kappa}$  é área específica. Neste trabalho são apresentados os resultados numéricos do  $D_{eff\ i}|_{\gamma\kappa}$ , tensor de difusividade efetiva. O Método de Volumes Finitos foi utilizado para discretizar o conjunto de equações do modelo e a resolução numérica foi realizada através do Software livre *OpenFoam V2.1.1*. Na Figura 1 (a)-(e) são apresentados os perfis de  $b_{iy}$  para  $\varepsilon_\gamma = 0,50$  sobre arranjos de cilindros inteiros e para  $\varepsilon_\gamma = 0,73$  sobre 1/8 de esferas.



**Fig. 1** – Em (a)-(e) os perfis de  $b_x$ ,  $b_y$  e  $b_z$  em arranjos de cilindros inteiros e 1/8 esferas; Em (f) e (g) corroboração com dados da literatura para 1/4 de cilindros.

Pelas propriedades de simetria e isotropia é suficiente usar arranjos de 1/4 cilindros ou 1/8 de esferas para calcular a função escalar  $b_x$ . Na Figura 2 são apresentadas as soluções numéricas obtidas neste trabalho, a solução analítica de Chang, dados numéricos de Ochoa-Tapia e Whitaker e dados do modelo de Maxwell e Quintard e Whitaker para o coeficiente de difusividade efetiva,  $D_{xx}$ . Os resultados obtidos neste trabalho para o coeficiente de difusividade efetiva em várias porosidades estão de acordo com resultados obtidos por outros autores e com os dados experimentais para arranjos de cilindros e esferas.



**Fig. 2** – Soluções numéricas deste trabalho, dados teóricos e experimentais da literatura.